

С целью проверки предложенного метода, была проведена развертка спектров кристалла алмаза с идеальной решеткой, а также, имеющей локальный дефект (вакансию). Результаты вычислений для расширенной в 4 раза идеальной ячейки (а) и расширенной в 32 раза ячейки с дефектом в виде вакансии (б) представлены на (рис.1).

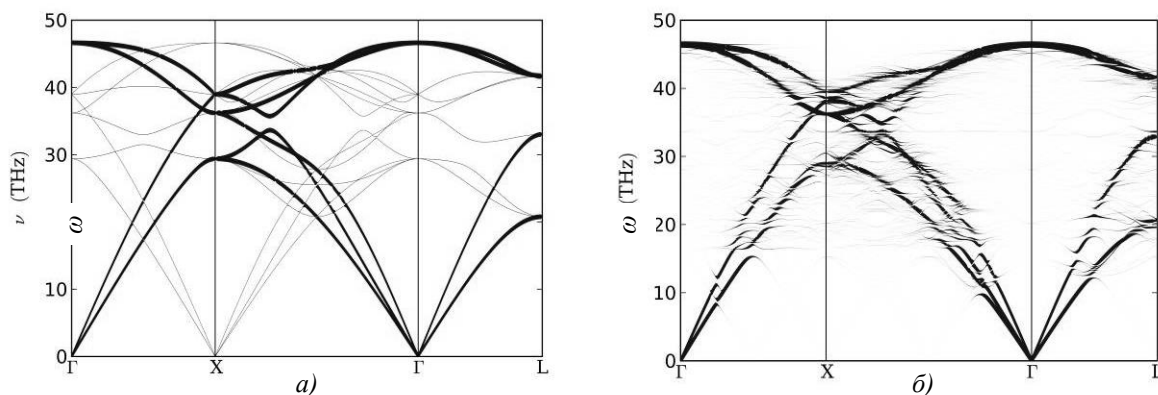


рис.1. Развертка колебательного спектра алмаза а) с расширенной в 4 раза, идеальной ЭЯ б) с расширенной в 32 раза, с дефектом. Толщина линий пропорциональна весу (2).

Как видно из (рис.1.а), развернутый спектр расширенной элементарной ячейки полностью воспроизводит колебательный спектр для стандартной ячейки кристалла алмаза. Таким образом, можно утверждать, что метод работает верно.

На (рис.1.б) видно нарушение в спектре - в ветвях колебательного спектра наблюдаются многочисленные разрывы, это следствие нарушения симметрии решетки - наличия вакансии одного атома углерода. Такие разрывы можно связать с проявлением частот локальных колебаний. Однако, общая форма развернутого спектра, аналогично (рис.1.а) совпадает со спектром для элементарной ячейки кристалла алмаза. Исходя из данных результатов, можно сделать вывод о том, что даже в кристаллах с наличием дефектов и, как следствие, сильно нарушенной симметрией, с помощью метода развертки можно исследовать влияние дефектов на структуру вещества и степень сохранения свойств симметрии исходного кристалла.

Список публикаций:

- [1] Гордиенко А.Б., Кособуцкий А.В. // Анализ электронной структуры кристаллов методом развертки энергетических зон. Физика твердого тела. 2016. Т. 58. № 3. С. 451-457.
- [2] Zeng F., Zhang P. // Phonon dispersion unfolding in the presence of heavy breaking of spatial translation symmetry. Comput. Mat. Sci. 2016. 125, 218.
- [3] Boykin T. B., Ajoy A., Ilatikhameneh H., Povolotskyi M., Klimeck G. // Brillouin zone unfolding method for effective phonon spectra. Phys. Rev. 2014. B. 90. 205214.
- [4] Борн М., Кунь Х. // Динамическая теория кристаллических решеток: Изд-во М.: Ил. 1958. 488с.
- [5] Popescu V., Zunger A. // Extracting  $E$  versus  $\vec{k}$  effective band structure from supercell calculations on alloys and impurities. Phys. Rev. 2012. B. 85. 085201.

## Определение магнитной восприимчивости вещества с помощью рычажных весов

**Груненко Виктория Дмитриевна**

**Федина Ольга Викторовна**

**Северо-Кавказский федеральный университет**

Диканский Юрий Иванович, д.ф.-м.н.

[vika\\_g96@mail.ru](mailto:vika_g96@mail.ru)

Существуют различные методы определения магнитной восприимчивости веществ. Например, с помощью баллистического метода определив намагниченность, можно рассчитать магнитную восприимчивость [1]. Однако недостатками этого метода являются: 1. Сложность проведения эксперимента: необходимо вручную с одинаковой скоростью многократно извлекать образец из соленоида; 2. На внутренних стенках тонкой, но длинной трубки остается большое количество исследуемого материала, иногда очень специфического и дорогостоящего. В статье предлагается метод определения магнитной восприимчивости веществ с помощью рычажных весов.

В центр магнитного поля созданного катушками Гельмгольца (1) помещалась горизонтальная часть прямоугольной проволоочной рамки (2), которая с помощью специального крепления подвешивалась к плечу рычажных весов (3). Ток в катушках Гельмгольца создавался двумя последовательно соединенными источниками питания НУ3010(4) и регистрировался с помощью амперметра PeakTeck 2005 (5). Ток в прямоугольной проволоочной рамке создавался источником питания GPR-7550D (6) и регистрировался с помощью амперметра PeakTeck 2005 (7). Магнитное поле в центре катушек измерялось с помощью тесламетра РНУWE и имело значение 7,9 мТл. Схема экспериментальной установки представлена на рисунке 1. Опыт проводился в два этапа.

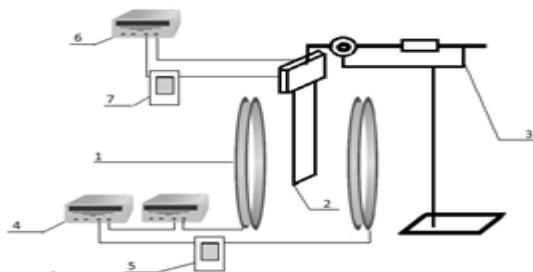


рис. 1. Схема экспериментальной установки.

С помощью катушек Гельмгольца создавалось магнитное поле. Весы уравнивались так, чтобы горизонтальная часть прямоугольной проволоочной рамки, находясь в воздухе, оказалась в центре магнитного поля. Регистрировалось начальное значение массы. Затем по рамке пропусклся ток, который изменялся от 1 до 5А (с шагом 1 А). При каждом значении тока весы уравнивались и регистрировались добавочные значения массы.

С помощью катушек Гельмгольца создавалось магнитное поле. Весы уравнивались так, чтобы горизонтальная часть прямоугольной проволоочной рамки, находясь в магнитной жидкости, оказалась в центре магнитного поля катушек. Горизонтальный участок проволоочной рамки, помещенный в магнитную жидкость, устанавливался так, чтобы при пропускании тока 1-5 А не действовала сила, вызванная неоднородностью магнитного поля в магнитной жидкости (внешнее магнитное поле катушек Гельмгольца отсутствует). Регистрировались показания начальной массы. Затем по рамке пропусклся ток, который изменялся от 1 до 5А (с шагом 1 А). При каждом значении тока весы уравнивались и регистрировались добавочные значения массы.

В эксперименте использовалась магнитная жидкость, представляющая коллоидный раствор магнетита в керосине. Магнитная жидкость наливалась в чашку Петри, боковая стенка которой внизу имела закругленную форму, занимая только нижнюю часть чашки, что позволяло считать, что она находится в сосуде, имеющем форму эллипса.

По полученным данным строились графики зависимости добавочной массы от силы тока в горизонтальной части проволоочной рамки (рис. 2).

По графикам определялся коэффициент  $k$  – отношение тангенса угла наклона графика зависимости добавочной массы от силы тока в горизонтальной части проволоочной рамки (горизонтальная часть проволоочной рамки в магнитной жидкости), к тангенсу угла наклона графика зависимости добавочной массы от тока в горизонтальной части проволоочной рамки (горизонтальная часть проволоочной рамки в воздухе).

Половина высоты магнитной жидкости в первом опыте  $a=1,8$  мм – малая полуось эллипсоида. Половина диаметра чашки Петри  $b=34,7$  мм – большая полуось эллипсоида.

Значение магнитной восприимчивости с учетом размагничивающего фактора рассчитывалось по формуле (1), приведенной ниже. Было получено значение для образца  $\chi = 4,2$ .

$$\chi = \frac{k-1}{1-kD}, \quad (1)$$

$$\text{где } D = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{1-e^2}}{2e^3} \left( \frac{e}{\sqrt{1-e^2}} - \arctg \frac{e}{\sqrt{1-e^2}} \right) - \text{размагничивающий фактор,}$$

$e = \sqrt{1 - \frac{a^2}{b^2}}$  - эксцентриситет эллиптической части чашки Петри.

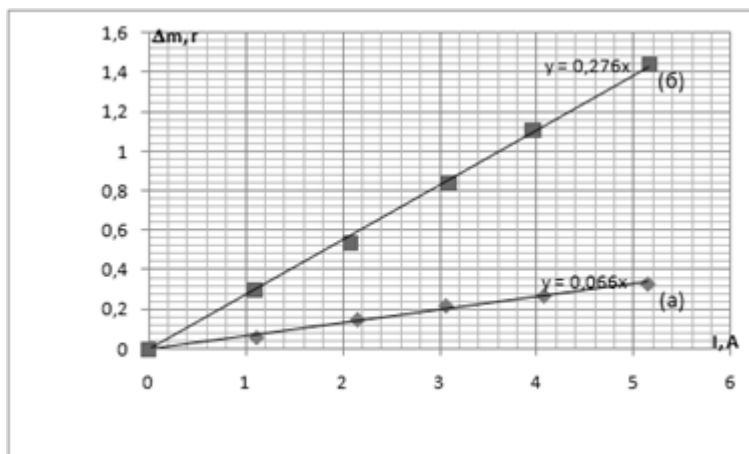


рис.2. Экспериментальная зависимость добавочной массы от силы тока: (а) - горизонтальная часть проволочной рамки в воздухе; (б) - горизонтальная часть проволочной рамки в магнитной жидкости.

Затем баллистическим методом (методом выдёргивания (удаления) образца из поля) была определена намагниченность образцов магнитной жидкости и рассчитана магнитная восприимчивость, значение последней составило 4,2.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о совпадении значений магнитной восприимчивости магнитной жидкости, определенной баллистическим методом и методом с использованием рычажных весов. Однако, метод с использованием рычажных весов гораздо проще и потери вещества в ходе эксперимента незначительные.

Список публикаций:

[1]. Диканский Ю.И. Эффекты взаимодействия частиц и структурно-кинетические процессы в магнитных коллоидах: Дис. д-ра физ.-мат. наук. Ставрополь, 1999.

## Исследование индуцированного пьезоэлектрического эффекта в неполярных кристаллах α-глицина

**Губарев Тимофей Дмитриевич**

Васильев Семен Григорьевич, Зеленовский Павел Сергеевич, Корюкова Татьяна Андреевна, Любомирский Игорь, Холкин Андрей Леонидович, Шур Владимир Яковлевич

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина

Шур Владимир Яковлевич, д.ф.-м.н.

Васильев Семен Григорьевич, к.ф.-м.н.

[gubarev-t@mail.ru](mailto:gubarev-t@mail.ru)

Глицин ( $C_2H_5NO_2$ ) – простейшая аминокислота, образующая три различных полиморфных фазы при кристаллизации из раствора. Наименее стабильная β-фаза имеет нецентросимметричную полярную структуру и обладает пьезо- и сегнетоэлектрическими свойствами. В то время как наиболее стабильная и потому подходящая для практического применения α-фаза обладает центросимметричной структурой, вследствие чего пьезоэлектрические свойства отсутствуют. Недавно было показано, что легирование центросимметричных кристаллов аминокислот другими аминокислотами может приводить к возникновению индуцированных пьезо- и пьезоэлектрических свойств [1], однако детальные исследования пьезоэлектрических свойств легированных кристаллов до настоящего времени не проводились.

В данной работе представлены результаты исследования пьезоэлектрических свойств кристаллов α-глицина, легированных аминокислотами L-аланин, L-треонин и L-серин. Кристаллы были предоставлены Институтом имени Вейцмана (Реховот, Израиль). Пьезоэлектрические свойства были исследованы методом силовой микроскопии пьезоэлектрического отклика (СМПО) с помощью сканирующего зондового микроскопа MFP-3D (Asylum Research, США).

Во всех исследованных образцах наблюдались высокие значения пьезоэлектрического отклика. Значения эффективного (локального) пьезоэлектрического коэффициента  $d_{eff}$  измерялись методом СМПО при различных